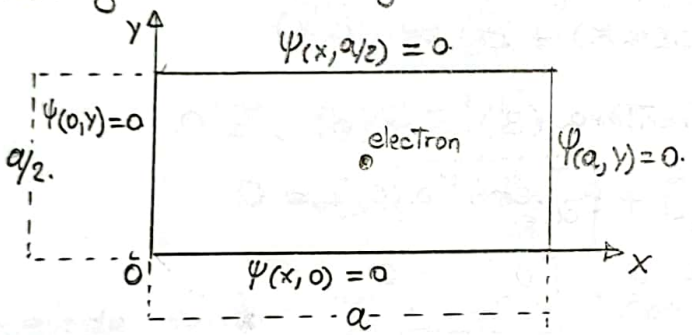
Universidad Andrés Bello

Solemne 3 - 2013

P.2| Considere la región $\Omega = [0,a] \times [0,a/2]$ en $\mathbb{R}^2$, y suponga un electron dentro de tal caja. Sea $\Psi \equiv \Psi(x,y)$ la función de onda de tal electron, de manera que si el electron se encuentra en un estado descrito por la función de onda $\Psi$, entonces se tiene la ecuación de Schrodinger $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = E\Psi$, donde $E$ es la energía del electron, $m$ su masa y $\hbar$ es la constante de Planck. Si $\Psi$ es igual a cero en todas las caras del rectangulo y se escogen unidades de manera que $\hbar^2 = 2m$, encuentre Todos los estados del electron cuya energía es menor o igual a $\frac{12\pi^2}{a^2}$.

Solución:

Tenemos: un rectangulo de las siguientes dimensiones:




Tenemos 4 condiciones de borde:

1) $\Psi(x,0) = 0$
2) $\Psi(x,a/2) = 0$
3) $\Psi(0,y) = 0$
4) $\Psi(a,y) = 0$

Se tiene la ecuación de Schrodinger $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = E\Psi$, pero como se estan tomando unidades adecuadas para hacer $\hbar^2 = 2m$, la ecuación que se debe resolver es: $-\Delta\Psi = E\Psi$

Debido a la geometria de la región rectangular, se usaran coordenadas cartesianas. En ese caso, la ecuación queda expresada como:

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]\Psi(x,y) = E\,\Psi(x,y) \quad \cdots(1)$$

Utilizando el método de separación de variables, podemos hacer el siguiente supuesto sobre la función $\Psi(x,y)$:

$$\Psi(x,y) = X(x)\,Y(y)$$

Reemplazamos en la ecuación (1):

$$-\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}[XY] + \frac{\partial^2}{\partial y^2}[XY]\right\} = E[XY]$$

$$-\left\{Y\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + X\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}\right\} = E[XY]$$



Escaneado con CamScanner

3/ simplificamos un poco la notación:

$$-[YX'' + XY''] = \epsilon XY$$

Dividimos entre $XY$, asumiendo que $XY \neq 0$.

$$-\left[\frac{YX''}{XY} + \frac{XY''}{XY}\right] = \epsilon \frac{XY}{XY}$$

$$-\left[\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y}\right] = \epsilon \quad \ldots (2)$$

Tomamos una constante de separación $-\alpha^2$ para $X''/X$:

$$\frac{X''}{X} = -\alpha^2 \quad \ldots (3)$$

la solución para dicha ecuación es:

$$X_\alpha(x) = A_\alpha \cos(\alpha x) + B_\alpha \operatorname{sen}(\alpha x)$$

Aplicamos la condición de frontera (3): $\psi(0, y) = 0$.

$$\Rightarrow X_\alpha(0) = A_\alpha \cos[\alpha(0)] + B_\alpha \operatorname{sen}[\alpha(0)] = 0$$

$$A_\alpha [1] + B_\alpha [0] = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{A_\alpha = 0}$$

Entonces $X_\alpha$ va quedando como: $X_\alpha(x) = B_\alpha \operatorname{sen}(\alpha x)$.

Aplicamos la condición de frontera (4): $\psi(a, y) = 0$.

$$\Rightarrow X_\alpha(a) = B_\alpha \operatorname{sen}[\alpha(a)] = 0$$

$$\operatorname{sen}[\alpha(a)] = 0 \quad ; \text{asumiendo } B_\alpha \neq 0.$$

$$\Rightarrow \alpha a = n\pi$$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha_n = \frac{n\pi}{a}} \quad n \geq 1 \quad \text{Valores admisibles de } \alpha_n$$

Entonces $X_\alpha$ queda como: $X_{\alpha_n}(x) = B_{\alpha_n} \operatorname{sen}(\alpha_n x)$

$$\boxed{X_n(x) = B_n \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi x}{a}\right]}$$

Ahora, tomamos la constante de separación $-\beta^2$ para $Y''/Y$:

$$\frac{Y''}{Y} = -\beta^2 \quad \ldots (4)$$

Escaneado con CamScanner

Universidad Andrés Bello

La solucion para dicha ecuación es:

$$Y_\beta(Y) = A_\beta \cos(\beta Y) + B_\beta \operatorname{sen}(\beta Y)$$

Aplicamos la condición de frontera (1): $\psi(x,0) = 0$.

$$\Rightarrow Y_\beta(0) = A_\beta \cos[\beta(0)] + B_\beta \operatorname{sen}[\beta(0)] = 0$$

$$A_\beta [1] + B_\beta [0] = 0.$$

$$\Rightarrow \boxed{A_\beta = 0.}$$

Entonces, $Y_\beta(Y)$ va quedando como: $Y_\beta(Y) = B_\beta \operatorname{sen}(\beta Y)$.

Aplicamos la condición de frontera (2): $\psi(x, a/2) = 0$

$$\Rightarrow Y_\beta(a/2) = B_\beta \operatorname{sen}\left[\beta(a/2)\right] = 0.$$

$$\operatorname{sen}\left[\beta\left(\frac{a}{2}\right)\right] = 0 \quad ; \text{asumiendo } B_\beta \neq 0.$$

$$\rightarrow \beta\left(\frac{a}{2}\right) = m\pi$$

$$\Rightarrow \boxed{\beta_m = \frac{2m\pi}{a}} \quad \text{valores admisibles de } \beta_m.$$

Entonces, $Y_\beta(Y)$ quede como: $Y_{\beta_m}(Y) = B_{\beta_m} \operatorname{sen}(\beta_m Y)$

$$\boxed{Y_m(Y) = B_m \operatorname{sen}\left[\frac{2m\pi}{a}\right]}$$

Ahora, retorneremos a la ecuacion (2) y reemplazaremos (3) y (4) en ella., Tenemos:

$$-[-\alpha^2 - \beta^2] = E$$

$$\alpha^2 + \beta^2 = E$$

reemplazamos las expresiones halladas para $\alpha$ y $\beta$:

$$\left[\frac{n\pi}{a}\right]^2 + \left[\frac{2m\pi}{a}\right]^2 = E$$

$$\left[\frac{\pi}{a}\right]^2 [n^2 + (2m)^2] = E$$

Ahora, nos solicitan hallar los estados menores o iguales a $12\frac{\pi^2}{a^2}$



Escaneado con CamScanner

4)

Para ello debemos hallar valores de $n$ y $m$ :

Tenemos:

| $n$ | $m$ | $n^2+4m^2$ | $\leq 12$. |
|---|---|---|---|
| 0 | 1 | $0+4$ | $=4$ |
| 1 | 0 | $1+0$ | $=1$ |
| 1 | 1 | $1+4$ | $=5$ |
| 2 | 1 | $4+4$ | $=8$. |
| 2 | 0 | $4+0$ | $=4$ |
| 3 | 0 | $9+0$ | $=9$. |

Entonces, tenemos:

6 estados: $(0,1)$
$(1,0)$
$(1,1)$
$(2,1)$
$(2,0)$
$(3,0)$.

$\Rightarrow$ nota) $n$ y $m$, deberian tomar valores. a partir de "1" porque $n=0$ ó $m=0$, anulan la funcion de onda lo que implicaria que el electron no se encuentra dentro de la region de estudio. En ese caso los estados serian unicamente: $(1,1)$ $(2,1)$

Ahora, debemos calcular el valor de $B_n$ y $B_m$ : Para ello nos apoyaremos de argumentos fisicos y expresaremos lo siguiente:

$$[B_n]^2 \int_0^a \operatorname{sen}^2\left[\frac{n\pi}{a}x\right]dx = 1 \Rightarrow B_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$[B_m]^2 \int_0^{a/2} \operatorname{sen}^2\left[\frac{2m\pi}{a}y\right]dy = 1 \Rightarrow B_m = \frac{2\sqrt{a}}{a}.$$

Podemos escribir la soluccon general, como:

$$\psi(x,y) = \sqrt{\frac{2}{a}}\ \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi}{a}x\right]\ \frac{2\sqrt{a}}{a}\ \operatorname{sen}\left[\frac{2m\pi}{a}y\right]$$

$$\boxed{\psi(x,y) = \frac{2\sqrt{2}}{a}\ \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi}{a}x\right]\ \operatorname{sen}\left[\frac{2m\pi}{a}y\right]}$$

con: $E = \left[\frac{\pi}{a}\right]^2 (n^2+(2m)^2)$ ;

Escaneado con CamScanner

Universidad Andrés Bello

Los estados solicitados, menores a $\frac{12\pi^2}{a^2}$ son:

$$\psi_1(x,y) = \frac{2\sqrt{2}}{a}\,\text{sen}\left[\frac{(0)\pi}{a}x\right]\text{sen}\left[\frac{2(1)\pi}{a}y\right]$$

$$\psi_2(x,y) = \frac{2\sqrt{2}}{a}\,\text{sen}\left[\frac{(1)\pi}{a}x\right]\text{sen}\left[\frac{2(0)\pi}{a}y\right]$$

$$\psi_3(x,y) = \frac{2\sqrt{2}}{a}\,\text{sen}\left[\frac{(1)\pi}{a}x\right]\text{sen}\left[\frac{2(1)\pi}{a}y\right]$$

$$\psi_4(x,y) = \frac{2\sqrt{2}}{a}\,\text{sen}\left[\frac{2\pi}{a}x\right]\text{sen}\left[\frac{2(1)\pi}{a}y\right]$$

$$\psi_5(x,y) = \frac{2\sqrt{2}}{a}\,\text{sen}\left[\frac{2\pi}{a}x\right]\text{sen}\left[\frac{2(0)\pi}{a}y\right]$$

$$\psi_6(x,y) = \frac{2\sqrt{2}}{a}\,\text{sen}\left[\frac{3\pi}{a}x\right]\text{sen}\left[\frac{2(0)\pi}{a}y\right]$$

## ANEXO

A lo largo de la solucion se han realizado asunciones, se han hallado cantidades y se han expresado afirmaciones. Todo lo anterior se sustenta en argumentos fisicos, que por la naturaleza del problema deben ser tomados en cuenta.

1 Se asume que $B_\alpha$ y $B_\beta$ deben ser distinto de cero.

Mas hallá de un sustento puramente algebraico que evita la solución trivial: Es decir:

$$B_\alpha \,\text{sen}[\alpha(0)] = 0 \quad \text{y} \quad B_\beta \,\text{sen}[\beta(a/2)] = 0 \quad \text{en ambos casos}$$

asumir que $B_\alpha$ y $B_\beta$ son cero, cumple la condicion expresada. Sin embargo, $B_\alpha$ y $B_\beta$ deben ser diferentes de cero, tambien, debido a que el electron sí o sí debe existir dentro de la region considerada en el problema. Es decir $B_\alpha = B_\beta = 0$ haría que la funccion de onda fuera indefectiblemente cero en todo punto de la region estudiada lo cual infringe lo expuesto en el problema.



Escaneado con CamScanner

6|

2 los valores de n y p deben ser enteros positivos mayores o iguales a

Como estamos tratando con estados electronicos de energía, estos deben encontrarse "cuantizados", es decir, no se permiten valores fraccionarios o negativos, ya que la energía siempre es positiva.
Tampoco pueden ser cero, porque eso anularia uno o ambos senos y por ende a la funcion de onda, haciendo que el electron no exista en la region descrita.

3 El calculo de Bn y Bm.
se utilizó el hecho de que el electron si o si debe existir en algún punto de la región estudiada, lo que se interpreta como que, la probabilidad de hallar el electron es siempre 1.

$$\Rightarrow \int \psi^*_{(x,y)}\,\psi_{(x,y)} = 1$$ como no estamos tratando con imaginarios $\psi^* = \psi$

reemplazando, tenemos:

Para $X_n$:

$$\int_0^a (B_n)\,\text{sen}\left[\frac{n\pi}{a}x\right](B_n)\,\text{sen}\left[\frac{n\pi}{a}x\right]dx = \int_0^a (B_n)^2\,\text{sen}^2\left[\frac{n\pi}{a}x\right]dx$$

2 nota:

$$\int \text{sen}^2(x)\,dx = \int \frac{1-\cos(2x)}{2}\,dx = \frac{1}{2}\int 1-\cos(2x)\,dx = \frac{1}{2}\left[\int dx - \int \cos(2x)dx\right]$$

$$\frac{1}{2}\left[x - \int \frac{\cos(2x)}{2}2dx\right] = \frac{1}{2}\left[x - \frac{1}{2}\text{sen}(2x)\right]$$

$$\Rightarrow \int_0^a (B_n)^2\,\text{sen}^2\left[\frac{n\pi}{a}x\right]dx = \frac{1}{2}\left[x\Big|_0^a - \frac{1}{2}\text{sen}\left[2\frac{n\pi}{a}x\right]\Big|_0^a\right](B_n)^2$$

$$= \frac{1}{2}\left\{a-0-\frac{1}{2}\left[\text{sen}\left(2\frac{n\pi}{a}a\right)-\text{sen}\left(2\frac{n\pi}{a}(0)\right)\right]\right\}(B_n)^2.$$

$$= \frac{1}{2}\left\{a-\frac{1}{2}\left[\text{sen}(2n\pi)^0-\text{sen}(0)^0\right]\right\}(B_n)^2.$$

$$= \frac{a}{2}(B_n)^2.$$

$$\Rightarrow \int_0^a \psi^*_{(x,y)}\,\psi_{(x,y)} = 1 \Rightarrow (B_n)^2\frac{a}{2} = 1 \Rightarrow B_n^2 = \frac{2}{a} \Rightarrow \boxed{B_n = \sqrt{\frac{2}{a}}}$$

Escaneado con CamScanner

Universidad Andrés Bello

Para $Y_m$:

$$\int_0^{a/2} (B_m)^2 \operatorname{sen}^2\left[\frac{2m\pi}{a}y\right] dy = (B_m)^2 \frac{1}{2}\left\{a/2 - 0 - \right.$$

$$\left.\frac{1}{2}\left[\operatorname{sen}\left((2)\frac{2m\pi}{a}\left(\frac{a}{2}\right)\right) - \operatorname{sen}\left(2\left(\frac{2m\pi}{a}(0)\right)\right)\right]^{0}\right\}$$

$$= (B_m)^2\left[\frac{a}{4}\right]$$

$$\Rightarrow (B_m)^2\left[\frac{a}{4}\right] = 1 \rightarrow B_m^2 = \frac{4}{a} \rightarrow B_m = \sqrt{\frac{4}{a}} \rightarrow B_m = \frac{2}{\sqrt{a}}$$

$$\rightarrow \boxed{B_m = \frac{2\sqrt{a}}{a}}$$



Escaneado con CamScanner